

was offensichtlich rot $\underline{A} = \underline{B}$ erfüllt, allerdings ist dies eine unsymmetrische Definition (anders als wir es beim Zeeman-Effekt getan hatten)¹⁵. Das Eigenwert-Problem wird zu:

$$\hat{H}_p \Phi = E \Phi,$$

wobei \hat{H}_p der Pauli-Hamiltonian ist:

$$\hat{H}_p = \frac{1}{2m_e} [\hat{p}_x^2 + (\hat{p}_y + e_0 B \cdot \hat{x})^2 + \hat{p}_z^2] + \mu_B B \hat{\sigma}_z$$

Dies haben wir für das Elektron aufgeschrieben ($e = -e_0$, $M \rightarrow m_e$).

Struktur der Lösung:

1. Zunächst stellen wir fest, dass \hat{H}_p unabhängig von y und z ist. Damit gilt:

$$[\hat{p}_y, \hat{H}_p] = [\hat{p}_z, \hat{H}_p] = 0$$

2. Außerdem ist das Magnetfeld ortsunabhängig. Hieraus folgt:

$$[\hat{\sigma}_z, \hat{H}_p] = 0$$

Es sind daher p_y, p_z, s_z Erhaltungsgrößen (Integrale der Bewegung). Die Operatoren $\hat{H}_p, \hat{p}_y, \hat{p}_z, \hat{\sigma}_z$ besitzen also die gemeinsamen Eigenfunktionen

$$|E p_y p_z \sigma_z\rangle,$$

mit der Abkürzung für den Eigenwert von \hat{s}_z (Eigenwert der Pauli-Matrix $\hat{\sigma}_z$) $2s_3 = \sigma_z = \pm 1$.

Ansatz in Orts-Spin-Darstellung: Wir setzen die Lösung als zweikomponentigen Spinor Φ an:

$$\Phi_\alpha(x, y, z) = e^{\frac{i}{\hbar}(y \cdot p_y + z \cdot p_z)} \cdot \chi_{\sigma_z} \cdot f_\alpha(x)$$

Hierbei ist $\alpha = \{p_y, p_z, \sigma_z, E\}$ ein Multiindex, stellvertretend für alle Quantenzahlen. Die Basis-Vektoren in der Spin-Darstellung waren:

$$\chi_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \chi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Setzt man dies mit obigem Ansatz in die Pauligleichung ein, so erhält man:

$$\left[\frac{\hat{p}_x^2}{2m_e} + \frac{1}{2m_e} (p_y + e_0 B \cdot x)^2 \right] f_\alpha(x) = \underbrace{\left(E - \frac{p_z^2}{2m_e} - \mu_B \sigma_z \cdot B \right)}_{=\tilde{E}} f_\alpha(x)$$

Man führt jetzt folgende Abkürzungen ein:

$$\begin{aligned} a &= \frac{1}{e_0} \frac{p_y}{B} = r_L \\ \tilde{x} &= x + a \\ \omega_L &= \frac{e_0 B}{m_e} = \frac{2\mu_B}{\hbar} \end{aligned}$$

¹⁵Die folgende Rechnung ist auch mit der vorigen Wahl von \underline{A} möglich.

Damit wird die obige Gleichung zu:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2}{d\tilde{x}^2} + \frac{1}{2} m_e \omega_L^2 \tilde{x}^2 \right] f_{\tilde{E}}(\tilde{x}) = \tilde{E} f_{\tilde{E}}(\tilde{x}),$$

was einem eindimensionalen harmonischen Oszillator entspricht. Die Energieeigenwerte für das Problem kennen wir schon, mit $n = 0, 1, \dots$ werden diese zu:

$$\tilde{E}_n = \hbar \omega_L \left(n + \frac{1}{2} \right).$$

Daraus ergeben sich die ursprünglichen Energie-Eigenwerte des Hamiltonoperators, E_{n,p_z,σ_z} , zu:

$$E_{n,p_z,\sigma_z} = \mu_B B (2n + 1 + \sigma_z) + \frac{p_z^2}{2m_e}. \quad (6.54)$$

Diese Energien sind die sogenannten **Landau-Niveaus**. Die Energie $\frac{p_z^2}{2m_e}$ beschreibt dabei die freie Bewegung des Elektrons parallel zu \underline{B} , die nicht quantisiert ist und beliebige kontinuierliche Werte haben kann. Der Anteil $\mu_B B (2n + 1 + \sigma_z)$ ist die quantisierte Energie in der Ebene senkrecht zur Magnetfeldorientierung. Für jedes n sind die Eigenfunktionen mit den Quantenzahlen $(n, \sigma_z = +1)$ und $(n + 1, \sigma_z = -1)$ entartet.

Eigenfunktionen: In Ortsdarstellung lauten die Eigenfunktionen des freien Elektrons im Magnetfeld analog zu denen des harmonischen Oszillators:

$$f_n(\tilde{x}) = c_n e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{\tilde{x}}{\tilde{x}_0} \right)^2} H_n \left(\frac{\tilde{x}}{\tilde{x}_0} \right),$$

und auch die Definition von \tilde{x}_0 ist analog zum harmonischen Oszillator:

$$\tilde{x}_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m_e \omega_L}}.$$

Die räumliche Ausdehnung der Wellenfunktion ist also proportional zu \tilde{x}_0 und damit proportionale zu $\frac{1}{\sqrt{B}}$. In der Klassik war das Elektron auf einer Zyklotronbahn um die Magnetfeldlinien mit dem Radius $r_L = \frac{v_{\perp}}{\omega_L}$ scharf lokalisiert. In der Quantenmechanik ist das Elektron dagegen „gefangen“ in einem „magnetischen Fallenpotential“, was eine endliche Ausdehnung gestattet,

$$V_B = \frac{m_e}{2} \omega_L^2 \tilde{x}^2$$

Das Elektron ist mit gegebenem p_y lokalisiert bei $x = -a = -cp_y / (e_0 B) = r_L$, wenn man $v_{\perp} = p_y / m_e$ einsetzt.

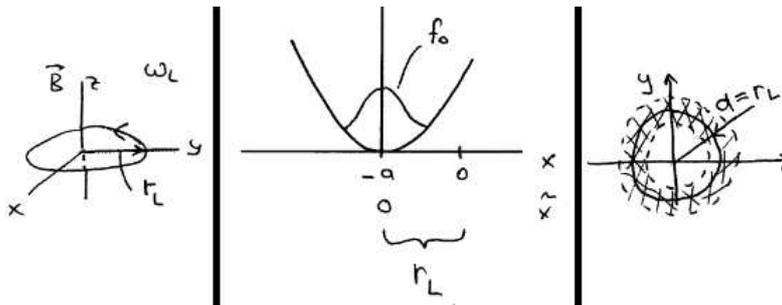


Abbildung 6.5: Links: Die klassische Zyklotronbahn mit Radius r_L . Mitte: Das Potential des Magnetfelds mit Mittelpunkt bei $-a = r_L$. Rechts: Das Elektron ist um die klassische Larmorbahn herum lokalisiert.

Anmerkung: In den obigen Gleichungen scheint es so, als sei die Lösung nicht symmetrisch bezüglich x und y . Dies ist nicht der Fall, sondern liegt nur an unserer Definition des Vektorpotentials \underline{A} . Siehe hierzu [Landau and Lifshitz, 1981].

Aufgabe: Man löse diese Aufgabe unter Verwendung der symmetrischen Form des Vektorpotentials (vgl. Zeeman-Effekt) und diskutiere die Wellenfunktionen.

6.8 Dynamik des Spins. Spinpräzession

Wir kehren nun zur Pauligleichung mit voller Zeitabhängigkeit zurück und wollen untersuchen, wie sich die Spin-Wellenfunktion mit der Zeit entwickelt,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Phi(\underline{r}, t) = \hat{H}_p \Phi(\underline{r}, t)$$

mit $\hat{H}_p = \hat{H}_p^0 + \Delta \hat{H}_S$. Hierbei ist \hat{H}_p^0 Spin-unabhängig. Im homogenen Magnetfeld ($\nabla B = 0$) gilt

$$[\hat{H}_p^0, \Delta \hat{H}_S] = 0,$$

und es lässt sich also wieder ein Separationsansatz für Φ machen:

$$\Phi(\underline{r}, t) = \psi^0(\underline{r}, t) \cdot \chi(t),$$

wobei beide Funktionen zeitabhängig sind und der Ortsteil die folgende Gleichung erfüllt:

$$i\hbar \frac{\partial \psi^0}{\partial t} = \hat{H}_p^0 \psi^0. \quad (6.55)$$

Setzen wir diesen Ansatz in die obige Pauligleichung ein, so erhalten wir:

$$i\hbar \chi \dot{\psi}^0 + i\hbar \psi^0 \dot{\chi} = (\hat{H}_p^0 + \Delta \hat{H}_S) \psi^0 \cdot \chi \quad (6.56)$$

$$i\hbar \psi^0 \dot{\chi} = \Delta \hat{H}_S \psi^0 \cdot \chi. \quad (6.57)$$

Nach Kürzen erhält man die gesuchte Bewegungsgleichung

$$i\hbar \frac{d\chi}{dt} = \Delta \hat{H}_S \cdot \chi(t), \quad (6.58)$$

mit der Anfangsbedingung:

$$\chi(0) = \chi_0.$$

Die Funktion $\chi(t)$ ist ein zweikomponentiger Spinor, dessen Komponenten jetzt zeitabhängig sind:

$$\chi(t) = \begin{pmatrix} \chi_1(t) \\ \chi_2(t) \end{pmatrix} = \chi_1(t) \cdot \chi_+ + \chi_2(t) \cdot \chi_-.$$

Hierbei sind χ_+ and χ_- die (zeitunabhängigen) Basiszustände (2-zeilige Spalten-Spinoren), und die adjungierten Zustände sind entsprechend Zeilenvektoren: $\chi_+^\dagger = (1, 0)$ und $\chi_-^\dagger = (0, 1)$. Die Normierung erfordert also für alle Zeiten gemäß:

$$1 = \|\chi(t)\|^2 = |\chi_1(t)|^2 + |\chi_2(t)|^2.$$

Für die Lösung von Gleichung (6.58) benutzen wir folgenden Ansatz:

$$\chi(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \Delta \hat{H}_S(t')} \chi(0). \quad (6.59)$$

Der Exponentialterm ist ein Operator in \mathcal{H}_s , also im Spinraum eine 2×2 -Matrix, der auf den Anfangs-Spinor wirkt. Wir erhalten diese Wirkung, wie üblich, durch eine Taylor-Entwicklung. Dabei ist

$$\Delta \hat{H}_S = \underbrace{-\frac{e}{2M} g_s \frac{\hbar}{2}}_{=\tilde{\mu}_B} \hat{\sigma} \cdot \underline{B}(t).$$

Weiter definieren wir eine effektive Frequenz (in Analogie zum Fall eines zeitunabhängigen Feldes):

$$\hbar \tilde{\Omega} t = \tilde{\mu}_B \int_0^t B(t') dt'.$$

Beispiel: Nun werden die vorigen Ergebnisse am Beispiel eines homogenen aber zeitlich veränderlichen Magnetfeldes

$$\underline{B}(t) = \{0, 0, B(t)\}$$

besprochen.

1. Aus der allgemeinen Lösung (6.59) folgt mit der Eigenschaft 8 der Spinmatrizen:

$$e^{-i\varphi \hat{\sigma}_z} = \hat{1} \cos \varphi - i \hat{\sigma}_z \sin \varphi$$

$$\chi(t) = \left[\hat{1} \cos \tilde{\Omega} t - i \hat{\sigma}_z \sin \tilde{\Omega} t \right] \chi_0$$

2. Eine alternative Lösung kann durch den Übergang zu den Spinorkomponenten in (6.58) erfolgen:

$$i\hbar \frac{d\chi_1}{dt} = \tilde{\mu}_B B(t) [\hat{\sigma}_z \chi(t)]_1 = \tilde{\mu}_B B(t) \left[\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{pmatrix} \right]_1 = \tilde{\mu}_B B(t) \chi_1(t),$$

wobei der Subskript "1" die erste Zeile des Matrixprodukts bezeichnet. Analog erhält man die zweite Gleichung zu:

$$i\hbar \frac{d\chi_2}{dt} = -\tilde{\mu}_B B(t) \chi_2(t)$$

Beide Gleichungen lassen sich leicht lösen durch:

$$\begin{aligned} \chi_1(t) &= e^{-\frac{i}{\hbar} \tilde{\mu}_B \int_0^t dt' B(t')} \chi_1(0) = e^{-i\tilde{\Omega}(t) \cdot t} \chi_1(0), \\ \chi_2(t) &= e^{+i\tilde{\Omega}(t) \cdot t} \chi_2(0). \end{aligned}$$

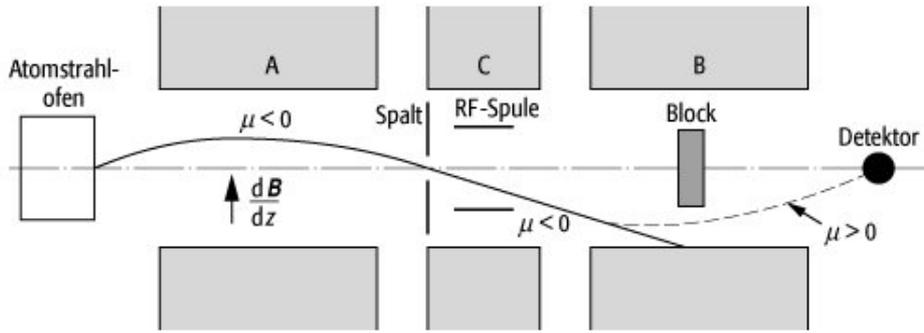


Abbildung 6.6: Atome aus einem Atomstrahl-ofen werden in einem ersten inhomogenen, permanenten Magnetfeld abgelenkt und treten dann in ein Radiofrequenz-Wechselfeld ein, das einem homogenen, permanenten Feld überlagert ist. Stimmt die Frequenz dieses Wechselfeldes mit der Frequenz eines Übergangs zwischen magnetischen Unterzuständen überein, so können Übergänge induziert werden, die die Richtung des magnetischen Moments des Atoms ändern. Atome, die einen solchen Übergang vollziehen, können durch ein zweites inhomogenes Magnetfeld selektiert werden. Diese Atome gelangen zum Detektor; diejenigen, die keinen Übergang machen, werden in die Gegenrichtung abgelenkt. Es ist also möglich, durch Verändern der Radiofrequenz ein Spektrum magnetischer Unterzustände zu messen. In der Abbildung bezeichnet μ das Magnetmoment. Wie beim Stern-Gerlach-Versuch ist die Kraft auf die Atome quantisiert, $\mathbf{F} = \nabla(\mu \cdot \mathbf{B})$. Quelle: Spektrum der Wissenschaft

Nun sind die Erwartungswerte der Spinoperatoren zu berechnen, da sie die relevanten Messgrößen darstellen:

$$\langle \hat{s} \rangle (t) = \frac{\hbar}{2} \chi^\dagger(t) \hat{\sigma} \chi(t).$$

Wir tun dies komponentenweise und illustrieren das für \hat{s}_z :

$$\begin{aligned} \langle \hat{s}_z \rangle (t) &= \frac{\hbar}{2} (\chi_1^*, \chi_2^*(t)) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \chi_1(t) \\ \chi_2(t) \end{pmatrix} \\ &= \frac{\hbar}{2} (|\chi_1(t)|^2 - |\chi_2(t)|^2) = \frac{\hbar}{2} (|\chi_{10}|^2 - |\chi_{20}|^2) \\ &= \langle \hat{s}_z \rangle (0). \end{aligned}$$

Die Spinkomponente parallel zum Magnetfeld ist also zeitlich konstant. Die Erwartungswerte $\langle \hat{s}_x \rangle$ und $\langle \hat{s}_y \rangle$ berechnen sich analog. Man findet leicht, dass sie um die Orientierung des Magnetfeldes rotieren, mit der Frequenz $\tilde{\Omega} = g_s \omega_L$.

Spinresonanz

Die Messung des Kernspins erfolgte erstmals 1933, durch I. Rabi, wofür er 1944 den Nobelpreis erhielt. Die Idee ist, eine Überlagerung von B_z und einem rotierenden dazu senkrechten Feld \underline{B}_\perp zu erzeugen (s. Abb. 6.6):

$$\underline{B} = (B_0 \cos \omega_0 t, B_0 \sin \omega_0 t, B_z),$$

wobei $B_z \gg B_0$ gelten soll. Das senkrechte Feld dreht s_z nach einer Zeit $t_F(\omega_L, \omega_0, m_s)$. Dies nennt man einen "Spin flip" oder „Rabiflop“. Hieraus ist die Bestimmung von m_s (und damit von g_s für das jeweilige Material) möglich. Man bekommt eine Resonanz bei $\omega_0 = g_s \cdot \omega_L$. Dies ist die Grundlage für die Kernspinresonanz (NMR), die die Wasserstoff-Konzentration

in organischer Materie messen kann. Durch tomographische Verfahren erhält man in einem inhomogenen Feld $B(\underline{r})$ darüber hinaus eine 3D-Auflösung,

$$\tilde{\Omega} \longrightarrow \tilde{\Omega}(\underline{r}) = \frac{\mu_B g_s}{\hbar} B(\underline{r}),$$

wodurch man orts aufgelöst m_s und damit die Konzentration $n(r)$ messen kann. Dies gelang 1973 experimentell dem Chemiker P. Lauterbur und dem Physiker P. Mansfield, wofür sie 2003 den Nobelpreis für Medizin erhielten. Mehr Informationen findet man in Ref. [Greiner, 1992].

6.9 Elektroneninterferenz im elektromagnetischen Feld. Aharonov-Bohm-Effekt. Flussquantisierung

Diser Abschnitt ist noch im Aufbau

Wir gehen aus vom Pauli-Hamiltonian für ein freies Elektron im stationären Magnetfeld,

$$\hat{H}_p^0 = \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - e\vec{A} \right)^2 + e\varphi + \Delta \hat{H}_s. \quad (6.60)$$

Wir betrachten jetzt den Fall, dass im Raumgebiet V gelten soll $\vec{B} = \text{rot} \mathbf{A} = 0$. Daraus folgt, dass sich \mathbf{A} durch eine skalare Funktion χ ausdrücken lässt, $\mathbf{A} = \nabla \chi$, da $\text{rot} \nabla \chi \equiv 0$.

Nun fragen wir, ob sich durch die Wahl der Eichung Potentiale \vec{A} und $\tilde{\varphi}$ finden lassen, so dass \hat{H}_p^0 unabhängig vom Magnetfeld wird, wodurch die mathematische Beschreibung erheblich vereinfacht würde. Der Spinbeitrag spielt dabei keine Rolle und wird im Folgenden weggelassen. Gesucht sind also ein \vec{A} und $\tilde{\varphi}$ mit der Eigenschaft,

$$\begin{aligned} \tilde{A} &= \vec{A} + \nabla \chi_E = \nabla \chi + \nabla \chi_E \equiv 0 \\ \tilde{\varphi} &= \varphi - \frac{d\chi_E}{dt} \equiv 0. \end{aligned}$$

Die Lösung für die gesuchte Eichtransformation ist also $\chi_E(\vec{r}, t) = -\chi(\vec{r}, t)$, und kann durch das Vektorpotential ausgedrückt werden:

$$\chi_E(\underline{r}) = - \int_{\mathbf{r}_0}^{\underline{r}} d\mathbf{s} \mathbf{A}(\mathbf{s}), \quad (6.61)$$

wobei \mathbf{r}_0 ein beliebiger Anfangspunkt ist. Weiter können wir annehmen, dass $\frac{d\chi_E}{dt} = 0$ ist und setzen $\varphi = \tilde{\varphi} = 0$. Nun verändert sich der Hamiltonian und die Wellenfunktion

$$\begin{aligned} \hat{H}_p^0 &\rightarrow \tilde{H}_p^0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \\ \psi(\vec{r}) &\rightarrow \tilde{\psi}(\vec{r}) = \psi(\vec{r}) e^{i\frac{e}{\hbar c} \chi_E(\vec{r})} \end{aligned} \quad (6.62)$$

Damit ist der gesamte Hamiltonian unabhängig vom elektromagnetischen Feld. Dieses bleibt aber präsent im Phasenfaktor der Wellenfunktion. Nun könnte man vermuten, dass dieser Phasenfaktor ohnehin irrelevant ist, aber dem ist nicht so. Natürlich entfällt der Phasenfaktor bei der Berechnung der Wahrscheinlichkeitsdichte $\tilde{\rho}(\mathbf{r})$, aber es lassen sich auch andere Observable finden, die von der Phase der Wellenfunktion abhängen. Das Standard-Beispiel ist ein Interferenz-Experiment, bei dem die Elektronen-“Bahn” aufgeteilt wird in zwei unterschiedliche Wege. Am Ende werden beide Beiträge einander wieder überlagert. Für das aktuelle System

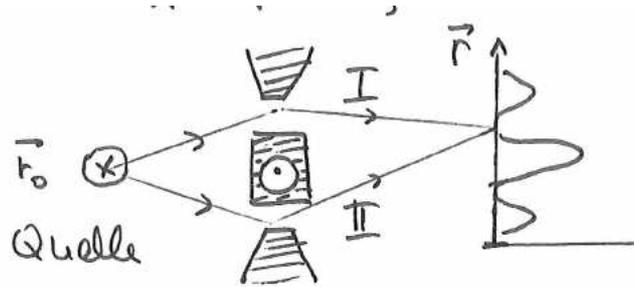


Abbildung 6.7: Illustration der Elektroneninterferenz beim Aharonov-Bohm-Effekt. Im Punkt r_0 wird der Elektronenstrahl in zwei Bestandteile getrennt, die um den mittleren Bereich herumgehen (im schraffierten Bereich kann ein von 0 verschiedenes Magnetfeld vorliegen, im Bereich der Elektronenbahnen verschwindet es) und sich im Punkt r wieder vereinigen. Das Interferenzmuster wird auf einem Schirm detektiert, und seine Abhängigkeit vom Endpunkt r ist rechts skizziert.

geht diese Idee zurück auf Y. Aharonov und D. Bohm¹⁶, die wir kurz erläutern.

Aharonov-Bohm-Effekt.

Aufgabe: Man finde die r -Abhängigkeit des Interferenzsignals und untersuche dessen Abhängigkeit von \mathbf{B} . Hinweis: man verwende den Stokeschen Satz.

6.10 Addition von Drehimpulsen in der Quantenmechanik. Spin-Bahn-Kopplung

Abschnitt im Aufbau

Abschließend machen wir noch ein paar Bemerkungen zur Addition von Drehimpulsen. Ein wichtiges Beispiel ist der Gesamtdrehimpuls eines Teilchens, $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{s}$, der für die korrekte Beschreibung von Atomen von zentraler Bedeutung ist (Spin-Bahn-Kopplung bzw. Engl. Spin-orbit coupling). Ein anderes Beispiel ist der Gesamtspin mehrerer Teilchen. Dies tritt bereits beim einfachsten Atom mit mehr als einem Elektron – dem Heliumatom – auf. Die quantenmechanische Addition der Elektronenspins führt dann auf die Singlet- bzw. Triplett-Zustände.

¹⁶Y. Aharonov and D. Bohm, Phys. Rev. **115**, 485 (1959)